

## POSUDEK ŠKOLITELE DIPLOMOVÉ PRÁCE

**Autor práce:** Bc. Klára Stefanová

**Název práce:** Vliv parametrů prostředí na poškození plasmidu DNA ionizujícím zářením

Diplomová práce Kláry Stefanové tematicky navazuje na její bakalářskou práci a výzkumný úkol. Autorka připravila sadu nástrojů a skriptů, umožňující automatizované vytváření modelů konfigurací plasmidů na atomární úrovni a modelování přímého a nepřímého účinku ionizujícího záření na tento typ biologického terče. Tyto nástroje dále využila k modelování vlivu parametrů prostředí jednak na konfiguraci plasmidu, jednak na výtěžky poškození vlivem ionizujícího záření.

Pro modelování radiolýzy vody Klára Stefanová použila přesný, ale výpočetně náročný přístup, tedy kombinaci podrobného modelu plasmidu a stochastického popisu chemické fáze. Pro simulaci účinku nabitých částic se přístup osvědčil, u simulací fotonového svazku ukázal, že by byl potřeba softwarový vývoj přesahující dostupný časový rámec, nebo přípravu spektra sekundárních částic předem.

Body zadání na úrovni odpovídající diplomové práci považuji za splněné a práci s literaturou za adekvátní.

Autorka pracovala samostatně a oceňuji, že se práci věnovala v průběhu celého roku.

Nástroje a skripty připravené v rámci autorka zveřejnila pomocí git repozitářů a budou tak k dispozici pro navazující výzkum. Výsledky práce jsou přínosné pro hodnocení přenositelnosti závěrů experimentů na plasmidech na úrovni buňky a lepší návrh budoucích experimentů.

Knihovna konfigurací plasmidů připravená podle bodů 2 a 3 zadání byla mimo dalšího zpracování Klárou Stefanovou využita i v rámci paralelní aktivity vývojářů Geant4-DNA a Topas MC z UCSF. Výsledkem jsou dva impaktované články, jeden přijatý, jeden podaný.

Práci doporučuji k obhajobě a navrhuji hodnocení B (velmi dobře).

V Praze dne 8.9.2021

Ing. Václav Štěpán, Ph.D.  
ÚJF AV ČR, v.v.i.